Environment Canada Environnement Canada

Modelling the Dissolved Oxygen Change in Streams Using Nonlinear Regression Analysis

A.H. El-Shaarawi,* A. Maul† and B.G. Brownlee*

*National Water Research Institute
Canada Centre for Inland Waters
Burlington, Ontario, Canada
L7R 4A6

†Centre des Sciences de l'Environnement
Université de Metz
Metz, France

SCIENTIFIC SERIES NO. 163

INLAND WATERS DIRECTORATE
NATIONAL WATER RESEARCH INSTITUTE
CANADA CENTRE FOR INLAND WATERS
BURLINGTON, ONTARIO, 1988

(Disponible en français sur demande)

Published by authority of
the Minister of the Environment

© Minister of Supply and Services Canada 1988

Cat. No. En 36-502/163E

ISBN 0-662-16064-9

Contents

Page

ABSTRACT v

RÉSUMÉ v

INTRODUCTION 1

THE MODELS 1
- Model 1 2
- Model 2 2
  - Estimation of the parameters of the model 2
- Model 3 2
  - Estimation of the parameters of the model 2
- Model 4 2
  - Estimation of the parameters of the model 3
- Model 5 3
  - Estimation of the parameters of the model 3

RESULTS AND DISCUSSION 4

REFERENCES 7

Table

1. Results of productivity analysis: parameter values and curve characteristics 5

Illustrations

Figure 1. Raw data from Canagagigue Creek for the study period 4

Figure 2. Photosynthesis-light responses using values of the parameters from models 1, 2, 3 and 4 5

Figure 3. Plots of observed and fitted concentrations of dissolved oxygen against sequential order of the observations for the study period 6

Figure 4. Component processes in the oxygen metabolism for the study period, calculated from the regression equations of the different models 7

Abstract

The application of nonlinear regression analysis to observed stream dissolved oxygen concentrations, by means of an oxygen mass-balance equation, provided estimates of the model parameters, which enabled further determination of the component processes in the oxygen metabolism in a segment of flowing water. The procedure was also used to identify photosynthesis-light (P-I) models for a Canadian river.

Five P-I models were examined, and although none of the models was accepted as strictly adequate, the study showed that the goodness of fit was substantially improved by using nonlinear photosaturation and photoinhibition models. No distinct photoinhibition was observed within the range of light intensity that occurred during the data period. Moreover, since none of the nonlinear models showed a significantly better fit to the data, we may conclude that any of the models can be used for assessing the component rates of dissolved oxygen change.

Résumé

Une analyse par régression non linéaire des concentrations d'oxygène dissous observées dans un cours d'eau, appliquée au moyen d'une équation du bilan massique de l'oxygène, a fourni les estimations des paramètres des modèles proposés pour rendre compte des processus participant au métabolisme de l'oxygène dans une partie d'un cours d'eau. La méthode a également été utilisée pour établir des modèles de la photosynthèse en fonction de l'éclairement pour un cours d'eau canadien.

Cinq modèles de la photosynthèse en fonction de l'éclairement ont été examinés, et même si aucun d'entre eux n'a été jugé parfaitement adéquat, l'étude a indiqué que l'utilisation de modèles non linéaires pour la photosaturation et la photo-inhibition améliorait de façon importante la qualité de l'ajustement. On n'a pas observé de photo-inhibition véritable dans la gamme d'éclairement qui a été enregistrée durant la période d'étude. De plus, comme la qualité de l'ajustement n'était significativement supérieure pour aucun des modèles non linéaires, on peut conclure que l'un ou l'autre des modèles peuvent être utilisés pour l'évaluation de la part de chacun des processus dans les changements des concentrations d'oxygène dissous.

Modelling the Dissolved Oxygen Change in Streams Using Nonlinear Regression Analysis

A.H. El-Shaarawi, A. Maul and B.G. Brownlee

INTRODUCTION

Four main processes affect the concentration of dissolved oxygen in a natural stream: photosynthetic production, diffusion, respiration, and drainage accrual. Oxygen is released into the water as a result of photosynthetic primary production. Diffusion is an exchange of oxygen with the air in a direction depending on the saturation gradient. There is an uptake of oxygen from the water as a result of the respiration of benthic or planktonic organisms and chemical oxidation. There may also be an influx of oxygen with accrual of ground water and surface drainage. All these factors interact to produce the daily curve of oxygen change in a segment of flowing water. These processes may be quantitatively summarized as follows:

$$q = p + d - r + a \qquad (1)$$

where q, p, d, r and a are expressed in concentration units (i.e., g m^{-3} h^{-1}) and denote the rates of change of dissolved oxygen, primary production, diffusion, respiration and drainage accrual, respectively (Odum, 1956). In the present study, accrual is assumed to be negligible relative to the other influences. Respiration is assumed to be constant (Odum, 1956; Schurr and Ruchti, 1975). We wish to propose here simple indirect methods for determining simultaneously the component rates of production, diffusion and respiration from the analysis of the observed curve of dissolved oxygen, assuming the data record consists of systematic measurements, spaced 1 h apart, from a single station. The procedure is based on regression analysis applied to nonlinear models that are derived from equation (1). It is further assumed that the stream studied is homogeneous, in the sense that the rates of photosynthesis, diffusion and respiration are the same in all sections of the river.

A variety of methods have been used to evaluate the different components of equation (1). Some of these methods (e.g., the method pioneered by Odum, 1956) suffer from a lack of mathematical closeness and may therefore give very approximate results. Other procedures have been developed on the basis of very stringent hypotheses; for example, in the models developed by Schurr and Ruchti (1975), the authors assumed proportionality between production and light intensity, although such an assumption may be valid for low light intensities only (Cosby and Hornberger, 1984).

It is the specific purpose of this work to present mathematical expressions that incorporate the effects of light intensity and temperature of the water and to demonstrate their application in the analysis of the temporal distribution of dissolved oxygen observed in Canagagigue Creek, Ontario. It is well known that temperature influences the rates of the physical and biochemical reactions that affect dissolved oxygen concentration, and also the rate and the direction of exchange of oxygen with the air through the oxygen saturation concentration of the water, which is a function of temperature and the atmospheric pressure (Hutchinson, 1957). Photosynthesis in relation to light intensity is a major topic in the study of primary productivity of water. The understanding and calculation of primary production are assisted by mathematical formulations of the photosynthesis-light relationship which contain biologically significant parameters. The photosynthesis-light relationship can be generalized as follows: photosynthesis increases linearly with light at low light intensities, becomes approximately constant at higher intensities (photosaturation), and in some cases begins to decline at even higher intensities (photoinhibition) (Cosby and Hornberger, 1984). Many mathematical models for describing this curvilinear relationship have been reported in the literature, and a comparison of the fit of several models with the photosynthesis-light curves of natural phytoplankton populations has been performed by Iwakuma and Yasuno (1983) and Cosby *et al.* (1984).

THE MODELS

The models presented in this section differ mainly in the formulation of the productivity-light relation, and the diffusion rate has always been assumed to be proportional to the difference (Δy) between the real dissolved oxygen concentration (y) in the water and its saturation value (O_s) (i.e., $\Delta y = O_s - y$). If we accept the first model considered below, the equations used lead to nonlinear models, and a method is given for assessing the parameters related to the various component rates. Although the algorithm used for

estimating these parameters follows the same general scheme for all the models, a detailed description of the procedure will be developed for each case.

The general expression for the model is

$$q = f(I) + k\,\Delta y - r + e \qquad (2)$$

where q is the n × 1 vector of observations (i.e., $q_t = y_{t+1} - y_t$, that is the difference of two successive values of the observed dissolved oxygen), f is a function of the light intensity I (E m^{-2} h^{-1}) measured for t = 1. . .m, k is the reaeration coefficient (h^{-1}), and e is the n × 1 vector of which the n elements are assumed to be independent normal variables each with zero mean and variance σ^2.

Model 1

If f is assumed to be a linear function of I, equation (2) becomes

$$q = \alpha I + k\,\Delta y - r + e \qquad (3)$$

and the parameters α, k and r can then be estimated directly by using linear regression analysis.

Model 2

The second model we considered, which is a photoinhibition model, is obtained by replacing f(I) in equation (2) by Steele's formula (Steele, 1962) as an equation for describing photosynthesis-light curve (i.e., $f(I) = p_{max}(I/I_s(e^{1-I/I_s}))$. This equation has two parameters: a maximum rate of photosynthesis (p_{max}) and the light intensity (I_s) at which the initial slope line reaches p_{max} before it decreases (photoinhibition effect).

Hence, the expression of q is given as

$$q = \alpha\, I\, e^{1-\beta I} + k\,\Delta y - r + e \qquad (4)$$

where $\alpha = p_{max}/I_s$ and $\beta = 1/I_s$.

Estimation of the Parameters of the Model

Since the right-hand side of regression equation (4) is not linear in all of the parameters, estimation of α, β, k and r will require an iterative procedure, which can be described as follows:

(i) Using a first-order Taylor series for $e^{1-\beta I}$ about an initial value β_0, the model can be written

$$q = \alpha\, I\, e^{1-\beta_0 I} + \delta\, I^2\, e^{1-\beta_0 I} + k\,\Delta y - r + e \qquad (5)$$

which is linear in the unknown parameters α, δ, k and r.

(ii) Starting with β_0, estimates of these parameters (i.e., $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\delta}_1$, $\hat{k}_1$ and $\hat{r}_1$) are obtained using least squares.

(iii) β_0 is then replaced by $\beta_1 = \beta_0 - \hat{\delta}_1/\hat{\alpha}_1$.

(iv) The iteration (i.e., (ii) and (iii)) continues until the difference between $\hat{\beta}_k$ and $\hat{\beta}_{k-1}$ is very small, i.e., $\hat{\delta}_k$ is less than a prespecified small value. At this stage the values of $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{k}$ and $\hat{r}$ are taken as $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\beta}_k$, $\hat{k}_k$ and $\hat{r}_k$.

Model 3

Another model considered in the present work is obtained by replacing f(I) in equation (2) by a saturation model (i.e., it does not take photoinhibition into account), which has been used by Smith (1936).

This leads to

$$q = \alpha \frac{I}{\sqrt{1 + \beta I^2}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (6)$$

Estimation of the Parameters of the Model

The parameters of the model, which are α, β, k and r, can be estimated by using the following algorithm:

(i) Expansion of the first term in the right-hand side of equation (6) in a first-order Taylor series about an initial value, β_0, of β and substitution of the resulting approximation into (6) gives:

$$q = \alpha \frac{I}{\sqrt{1 + \beta_0 I^2}} + \delta \frac{I^3}{2\sqrt{(1 + \beta_0 I^2)^3}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (7)$$

which is linear in the unknown parameters α, δ, k and r. Steps (ii), (iii) and (iv) are exactly the same as those used for model 2.

Model 4

Another photoinhibition model is obtained by replacing f(I) in equation (2) by Vollenweider's formula (Vollenweider, 1965). This gives:

$$q = \alpha \frac{I}{\sqrt{1 + \beta I^2}\sqrt{1 + a^2 \beta I^2}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (8)$$

where α is a photoinhibition parameter which becomes 0 when photoinhibition does not occur.

Estimation of the Parameters of the Model

The procedure used for estimating the unknown parameters (i.e., α, β, a, k and r) is quite similar to those applied in the previous cases, although the calculations are more tedious. Thus,

(i) The first term in the right-hand side of equation (8) is expanded in a first-order Taylor series about two initial estimates (i.e., α_0 and β_0) of α and β. Substituting the resulting approximation into (8) leads to:

$$q = \alpha \frac{I}{\sqrt{1+\beta_0 I^2}\sqrt{1+a_0^2\beta_0 I^2}} + \delta \frac{I^3}{\sqrt{1+\beta_0 I^2}\sqrt{(1+a_0^2\beta_0 I^2)^3}} + \gamma \frac{I^3}{\sqrt{(1+\beta_0 I^2)^3}\sqrt{1+a_0^2\beta_0 I^2}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (9)$$

which is linear in the unknown parameters α, δ, γ, k and r.

(ii) Starting with a_0 and β_0, estimates of the parameters (i.e., $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\delta}_1$, $\hat{\gamma}_1$, $\hat{k}_1$ and $\hat{r}_1$) are obtained using linear regression analysis.

(iii) a_0 and β_0 are then replaced by, respectively,

$$\alpha_1 = \alpha_0 - \frac{\hat{\delta} - a_0^2\hat{\gamma}}{\hat{\alpha}\, a_0\, \beta_0}$$

and

$$\beta_1 = \beta_0 - \frac{2\hat{\gamma}}{\hat{\alpha}}$$

and step (ii) is repeated on the basis of the new values a_1 and β_1.

(iv) The iteration stops as soon as both the differences $\hat{a}_k - \hat{a}_{k-1}$ and $\hat{\beta}_k - \hat{\beta}_{k-1}$ are very small, that is when $\hat{\delta}_k^2 + \hat{\gamma}_k^2$ is less than a prespecified small value. The values of $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{a}$, $\hat{k}$ and $\hat{r}$ are then taken as $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\beta}_k$, $\hat{a}_k$, $\hat{k}_k$ and $\hat{r}_k$, respectively.

Model 5

The dissolved oxygen concentration observed at a given time may be considered as an outcome of the previous recorded values for the light intensity (at least over a certain period of time). An appropriate model for describing this situation has been developed by Dhrymes (1971); it is known as a model with geometrically distributed lags. Thus, in equation (2) $f(I_k)$ is replaced by

$$p_t = \alpha \sum_{i=0}^{+\infty} \rho^i I_{t-i}$$

where I_{t-i} is the light intensity at time t-i and ρ is the unknown lag parameter of the model. When the values I_{-i} (i = 0,1. . .) are unknown, one can eliminate them from the model by introducing the additional parameter w, which is given by $w = \alpha \sum_{i=0}^{+\infty} \rho^i I_{-i}$. Hence, model (2) can be rewritten as

$$q_t = w\rho^t + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} \rho^i I_{t-i} + k\,\Delta y_t - r + e$$

$$t = 1,2. . .n \qquad (10)$$

Note that when ρ is known, this is a linear regression model, but since the lag parameter ρ is unknown in the present case, the model is only partially linear. The procedures developed by El-Shaarawi (1977) and Shah and El-Shaarawi (1980) can be used for estimating the parameters w, α and ρ and calculating their exact confidence intervals at a given probability level.

Estimation of the Parameters of the Model

To find $\hat{w}$, $\hat{\alpha}$ and $\hat{\rho}$,

(i) We linearize the expression of q_t by expanding ρ^t in a first-order Taylor series about an initial estimate ρ_0; this leads to

$$q_t = w\rho_0^t + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} \rho_0^i I_{t-i} + \delta\left[wt\rho_0^{t-1} + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} i\rho_0^{i-1} I_{t-i}\right] + k\,\Delta y_t - r + e \qquad (11)$$

where $\delta = \rho - \rho_0$ and t = 1,2. . .n.

(ii) For a given value of ρ (e.g., $\rho = 0.5$), estimates $\hat{w}_0$ and $\hat{\alpha}_0$ for w and α are obtained from (10) using linear regression analysis.

(iii) We next consider model

$$q_t = w\,\rho_0^t + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} \rho_0^i\, I_{t-i}$$

$$+ \delta \left[\hat{w}t\rho_0^{t-1} + \hat{\alpha}_0 \sum_{i=0}^{t-1} i\rho_0^{i-1}\, I_{t-i}\right]$$

$$+ k\,\Delta y_t - r + e \qquad (12)$$

which is linear in w, α, δ, k and r.

(iv) This gives new estimates $\hat{w}_1$, $\hat{\alpha}_1$ and $\hat{\delta}_1$ for w, α and δ, respectively.

(v) In model (12), $\hat{\rho}_0$, $\hat{w}_0$ and $\hat{\alpha}_0$ are then replaced by $\hat{\rho}_1 = \hat{\delta}_1 + \hat{\rho}_0$, $\hat{w}_1$ and $\hat{\alpha}_1$, respectively, and regression analysis is repeated.

(vi) The procedures stops as soon as $\delta_k = \rho_k - \rho_{k-1}$ is smaller than a prespecified value, and the estimates of w, α, ρ, k and r are then taken as $\hat{w}_k$, $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\rho}_k$, $\hat{k}_k$ and $\hat{r}_k$, respectively.

It must be emphasized that all the models are interrelated; for example, if a = 0 in model 4, then we obtain model 3, and if $\beta = 0$ in model 2 or model 3, then we reach the linear model (i.e. model 1). Moreover, model 1 is also a special case of model 5, since equation (10) simplifies to equation (3) when ρ is set equal to zero. Furthermore, note that when I = 0, there is no production and models 1, 2, 3 and 4 reduce to

$$q = k\,\Delta y - r + e \qquad (13)$$

This offers a very simple way to assess the parameters k and r. Hence, from equation (2) it can be stated that the production at stage t is then given as $p_t = q_t - \hat{k}\,\Delta y_t + \hat{r}$. Thus, the type of the relationship between the production and the light intensity (P - I curve) can be evaluated graphically from the plot of p_t versus I_t.

RESULTS AND DISCUSSION

The raw data from Canagagigue Creek for the study period are presented in Figure 1, which shows the temporal variation of the oxygen concentration observed and the oxygen concentration at saturation, the light intensity and the temperature in parts (a), (b) and (c), respectively. The saturation value of the oxygen concentration was calculated from the measured temperature and was corrected for 200-m elevation above sea level.

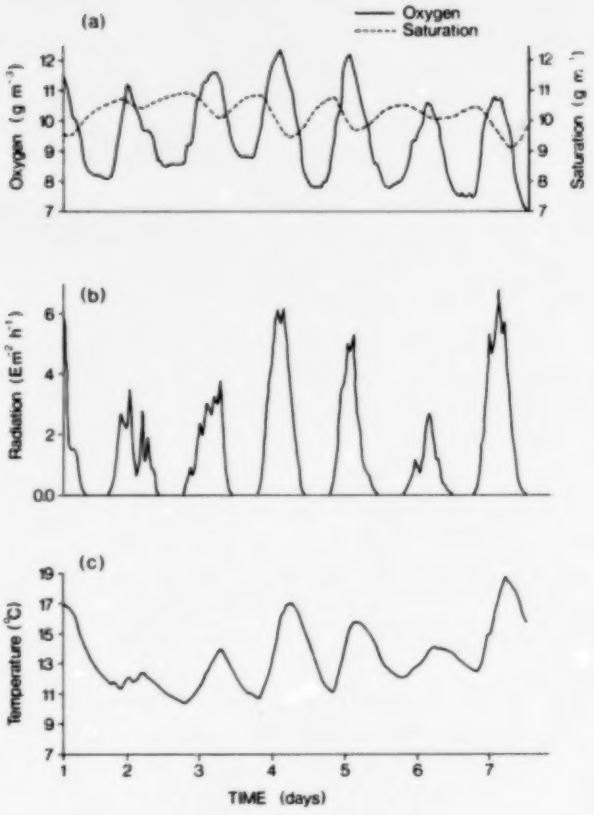

Figure 1. Raw data from Canagagigue Creek for the study period.

The component processes in the oxygen metabolism of a stream, i.e., the primary production, the oxygen exchange constant and the rate of respiration, were determined by means of nonlinear regression analysis applied to a simple oxygen mass balance equation (see equation (1)). This approach is quite different from the cross-correlation computational technique developed by Schurr and Ruchti (1975) or the extended Kalman filter used by Cosby *et al.* (1984) to provide estimates of the model parameters. Thus, the algorithms presented in the previous section for modelling the rate of change of dissolved oxygen led to the following regression equations, which were obtained by specially written programs using APL computer system:

$q = 0.215\,\Delta y - 0.578$ (equation 13)

$$q = 0.265\, I + 0.250\, \Delta y - 0.611 \qquad \text{(model 1)}$$

$$q = 0.246\, I\, e^{1-0.149I} + 0.329\, \Delta y - 0.870 \qquad \text{(model 2)}$$

$$q = 0.602\, I/\sqrt{1 + 0.108 I^2} + 0.328\, \Delta y - 0.866 \qquad \text{(model 3)}$$

$$q = 0.651\, I/\sqrt{1 + 0.180 I^2}\ \sqrt{1 + 0.004 I^2} + 0.331\, \Delta y - 0.879 \qquad \text{(model 4)}$$

$$q_t = 111.253 \times 0.001^t + 0.264 \sum_{i=0}^{t-1} 0.001^i\, I_{t-i} + 0.251\, \Delta y - 0.611 \qquad t = 1 \ldots n \qquad \text{(model 5)}$$

Figure 2 is a plot of the realized photosynthesis-light relationship for the first four models considered. The figure indicates that no distinct photoinhibition was observed within the range of light intensity that occurred during the data period. Models 2, 3 and 4 were generally representative of the photosynthesis-light behaviour, moreover the similarity of the photosynthesis-light responses for those models is apparent.

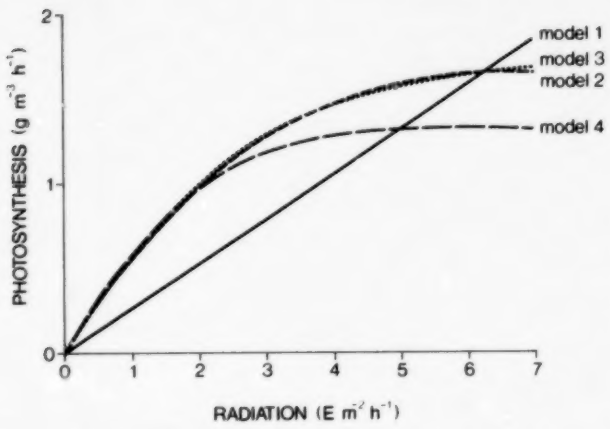

Figure 2. Photosynthesis-light responses using values of the parameters from models 1, 2, 3 and 4.

The estimates of the component parameters, the values of p_{max}, I_s and the slope (E_0) of the P-I curve as light intensity approaches zero are summarized in Table 1. The residuals, which are listed in the last column of Table 1, permit a rough comparison of the relative goodness of fit for each model.

A more convenient way to evaluate the relative goodness of fit is given in Figure 3, where both the observed and the predicted rates of changes of dissolved oxygen are plotted against time. This has been done for each model in Figures 3(a), (b), (c) and (d), respectively. Any systematic difference between the two curves is due to the lack of fit of the model.

As can be seen in Figure 3 and from the residuals recorded in Table 1, model 1 (the linear model) does not fit the data very well. The proportion of the variance explained by this model is approximately 45% ($R^2 \simeq 0.45$). Furthermore, the turning-points test (Kendall and Stuart, 1968) was used to test for the randomness in the series of residuals, in other words, the problem was to know whether the series of residuals differs significantly from a random white noise sequence. The null hypothesis (i.e., randomness of the residuals) has been rejected at the 1% level for model 1, whereas the test was less significant for both models 2 and 3 ($P \simeq 0.0475$) and also model 4 ($P \simeq 0.0314$). Although none of the models can be accepted as strictly adequate, a substantial improvement, however, is obtained with models 2, 3 and 4 ($R^2 \simeq 0.60$ for all three of them) when compared with model 1. Thus, the goodness of fit is quite parallel for those three models, which subsequently yielded very similar parameter values and curve characteristics especially for models 2 and 3 (see Figure 2 and Table 1). The close agreement between reaeration and respiration rates, which has been observed more particularly for models 2, 3 and 4, was expected, since the processes of reaeration and respiration are explicitly independent of light or photosynthesis in the mass balance equation. Hence, any of the equations (4), (6) or (8) can be used to assess the component rates of dissolved oxygen.

Table 1. Results of Productivity Analysis: Parameter Values and Curve Characteristics

Models	E_0	P_{max} (g m^{-3} h^{-1})	I_s (E m^{-2} h^{-1})	k (h^{-1})	r (g m^{-3} h^{-1})	Residuals
1	0.265	Undefined	Undefined	0.250	0.611	13.115
2	0.669	1.654	6.717	0.329	0.870	9.560
3	0.602	1.831	Undefined	0.328	0.866	9.557
4	0.651	1.327	5.955	0.331	0.879	9.514
5*			$\rho \simeq 0.001$	0.251	0.611	13.111

*Since model 5 did not show any improvement when compared with model 1 (which is a special case of model 5 when $\rho = 0$), it was not considered any further.

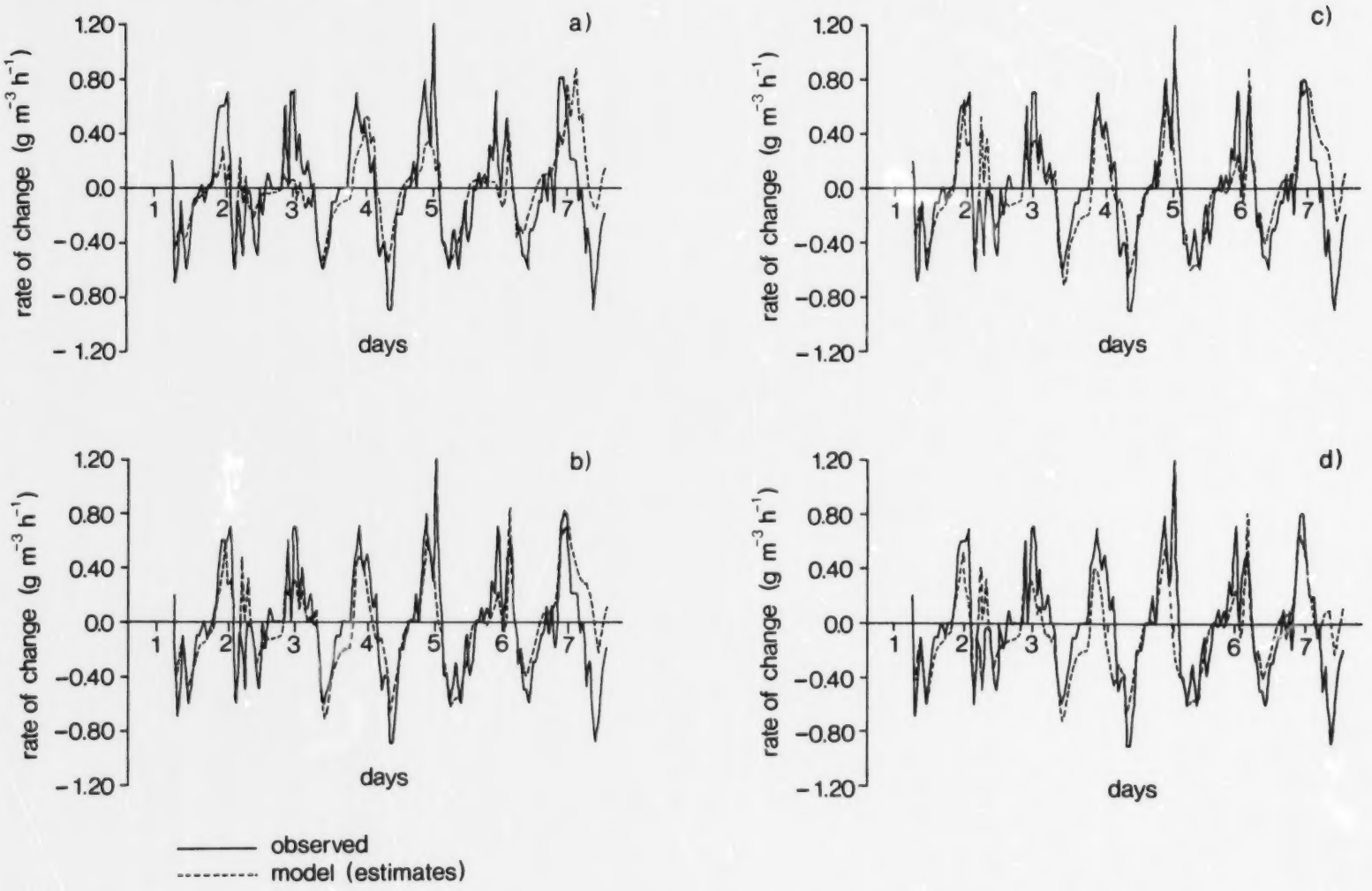

Figure 3. Plots of observed and fitted concentrations of dissolved oxygen against sequential order of the observations for the study period.

If the estimates of k and r calculated from equation (13) (i.e., when I = 0) are taken into account, the reaeration and respiration rates calculated from all the regression equations considered fell in the range 0.22-0.33 h^{-1} and 0.58-0.88 g m^{-3} h^{-1}, respectively. This is in agreement with the values observed by Cosby *et al.* (1984) for a small second-order stream in Denmark and also the values reported by Schurr and Ruchti (1975) for several Swiss rivers.

As well, with model parameters in hand, it becomes possible to distinguish and to assess separately the different components which interact to produce the daily curve of oxygen change. These components (i.e., production, diffusion and respiration) are embodied in the regression equation that describes the oxygen balance. Thus, the component processes in the oxygen metabolism for the study period were calculated from the fitted regression equations and the curves obtained for each model are given in Figures 4a to 4d, respectively. The combined effect of production (p), diffusion (d) and respiration (r) is given in the rate of change curve (q). These curves, which can be considered as characteristic of a given segment of flowing water at least over a specific period of time, can undoubtedly help in understanding the mechanisms and the relative importance of the component processes in the oxygen metabolism. For example, it is of interest to note, as it clearly appears in the diffusion curve, that the exchange of oxygen with the air was not well balanced for the section of the stream studied, since invasion was more important than outgassing. The work reported here showed, by means of an example, that regression analysis applied to nonlinear models provides an appropriate tool for carrying out the assessment of the component processes in the daily dissolved oxygen metabolism of a stream.

REFERENCES

Cosby, B.J., and G.M. Hornberger. 1984. Identification of photosynthesis-light models for aquatic systems. I. Theory and simulations. Ecol. Modelling, 23: 1-24.

Cosby, B.J., G.M. Hornberger, and M.G. Kelly. 1984. Identification of photosynthesis-light models for aquatic systems. II. Application to a macrophyte dominated stream. Ecol. Modelling, 23: 25-51.

Dhrymes, P.J. 1971. *Econometrics: Statistical Foundations and Applications*. Harper & Row, New York.

El-Shaarawi, A. 1977. Marginal likelihood solution to some problems connected with regression analysis. J. R. Stat. Soc. B., 39: 343-348.

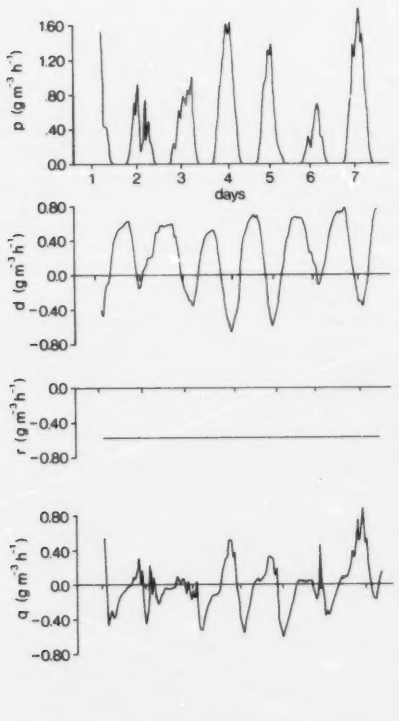

Figure 4a. Component processes in the oxygen metabolism calculated from model 1.

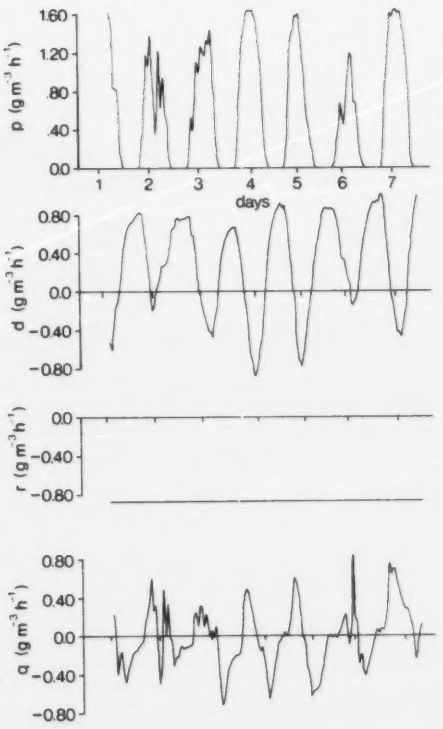

Figure 4b. Component processes in the oxygen metabolism calculated from model 2.

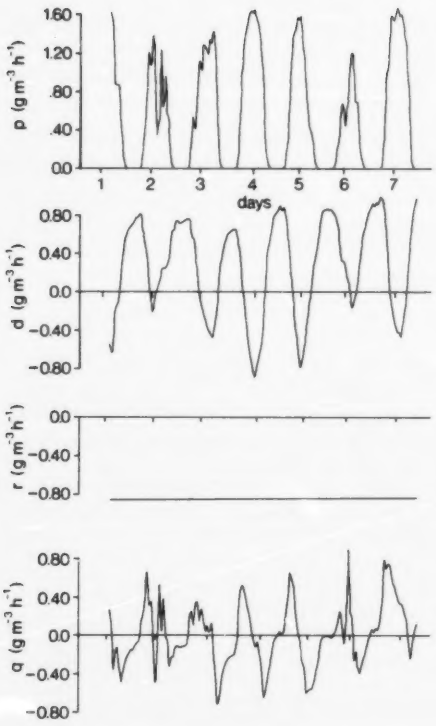

Figure 4c. Component processes in the oxygen metabolism calculated from model 3.

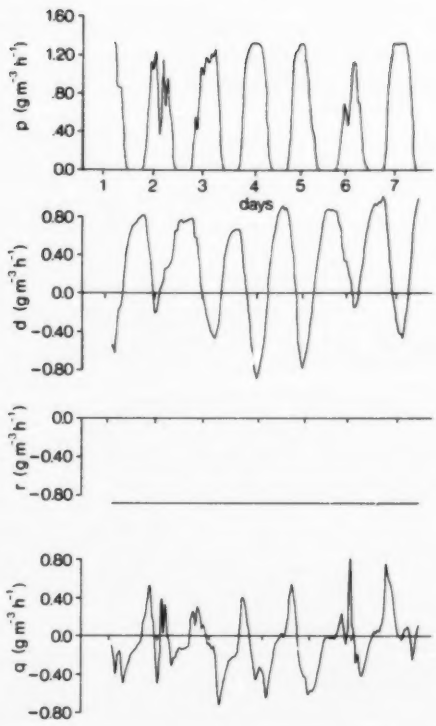

Figure 4d. Component processes in the oxygen metabolism calculated from model 4.

Hutchinson, G.E. 1957. *A Treatise on Limnology*. Vol. 1, Wiley, New York, pp. 580-581.

Iwakuma, T., and M. Yasuno. 1983. A comparison of several mathematical equations describing photosynthesis-light curve for natural phytoplankton populations. Arch. Hydrobiol., 97: 208-226.

Kendall, M.G., and A. Stuart. 1968. *The Advanced Theory of Statistics*. Vol. 3. Design and Analysis, and Time Series. 2nd ed., Hafner, New York, pp. 350-352.

Odum, H.T. 1956. Primary production in flowing waters. Limnol. Oceanogr., 1: 102-117.

Schurr, J.M., and J. Ruchti. 1975. Kinetics of oxygen exchange, photosynthesis, and respiration in rivers determined from time-delayed correlations between sunlight and dissolved oxygen. Schweiz. Z. Hydrol., 37: 144-174.

Shah, K.R., and A. El-Shaarawi. 1980. Interval estimation in models with distributed lags. In: *Multivariate Statistical Analysis*, R.P. Gupta (ed.), North-Holland Publ. Co., New York, pp. 191-197.

Smith, E.L. 1936. Photosynthesis in relation to light and carbon dioxide. Proc. Nat. Acad. Sci. Wash., 22: 504-511.

Steele, J.H. 1962. Environmental control of photosynthesis in the sea. Limnol. Oceanogr., 7: 137-150.

Vollenweider, R.A. 1965. Calculation models of photosynthesis-depth curves and some implications regarding day rate estimates in primary production measurements. Mem. Ist. Ital. Idrobiol. Suppl., 18: 425-457.

Environnement Canada Environment Canada

Modélisation des fluctuations de l'oxygène dissous dans les cours d'eau par analyse de régression non linéaire

A.H. El-Shaarawi*, A. Maul† et B.G. Brownlee*

* Institut national de recherche sur les eaux
Centre canadien des eaux intérieures
Burlington (Ontario) Canada
L7R 4A6

† Centre des Sciences de l'Environnement
Université de Metz
Metz, France

ÉTUDE N° 163, SÉRIE SCIENTIFIQUE

DIRECTION GÉNÉRALE DES EAUX INTÉRIEURES
INSTITUT NATIONAL DE RECHERCHE SUR LES EAUX
CENTRE CANADIEN DES EAUX INTÉRIEURES
BURLINGTON (ONTARIO) 1988

(Available in English on request)

Publié avec l'autorisation
du ministre de l'Environnement

© Ministre des Approvisionnements et Services Canada 1988

N° de cat. En 36-502/163F

ISBN 0-662-94816-5

Table des matières

Page

RÉSUMÉ v

ABSTRACT v

INTRODUCTION 1

LES MODÈLES 2
Modèle 1 2
Modèle 2 2
Estimation des paramètres du modèle 2
Modèle 3 2
Estimation des paramètres du modèle 2
Modèle 4 3
Estimation des paramètres du modèle 3
Modèle 5 3
Estimation des paramètres du modèle 4

RÉSULTATS ET DISCUSSION 4

RÉFÉRENCES 8

Tableau

1. Résultats de l'analyse de la productivité : valeurs des paramètres et caractéristiques des courbes. 5

Illustrations

Figure 1. Données brutes de l'étude du ruisseau Canagagique 5

Figure 2. Courbes de la photosynthèse en fonction de l'éclairement obtenues à l'aide des valeurs des paramètres calculées au moyen des modèles 1, 2, 3 et 4 5

Figure 3. Courbes des concentrations observées et ajustées de l'oxygène dissous en fonction du temps pour la période d'étude 6

Figure 4. Courbes des phénomènes participant au métabolisme de l'oxygène, calculées à partir des équations de régression des modèles 7

Résumé

Une analyse par régression non linéaire des concentrations d'oxygène dissous observées dans un cours d'eau, appliquée au moyen d'une équation du bilan massique de l'oxygène, a fourni les estimations des paramètres des modèles proposés pour rendre compte des processus participant au métabolisme de l'oxygène dans une partie d'un cours d'eau. La méthode a également été utilisée pour établir des modèles de la photosynthèse en fonction de l'éclairement pour un cours d'eau canadien.

Cinq modèles de la photosynthèse en fonction de l'éclairement ont été examinés, et même si aucun d'entre eux n'a été jugé parfaitement adéquat, l'étude a indiqué que l'utilisation de modèles non linéaires pour la photosaturation et la photo-inhibition améliorait de façon importante la qualité de l'ajustement. On n'a pas observé de photo-inhibition véritable dans la gamme d'éclairement qui a été enregistrée durant la période d'étude. De plus, comme la qualité de l'ajustement n'était significativement supérieure pour aucun des modèles non linéaires, on peut conclure que l'un ou l'autre des modèles peuvent être utilisés pour l'évaluation de la part de chacun des processus dans les changements des concentrations d'oxygène dissous.

Abstract

The application of nonlinear regression analysis to observed stream dissolved oxygen concentrations, by means of an oxygen mass-balance equation, provided estimates of the model parameters, which enabled further determination of the component processes in the oxygen metabolism in a segment of flowing water. The procedure was also used to identify photosynthesis-light (P-I) models for a Canadian river.

Five P-I models were examined, and although none of the models was accepted as strictly adequate, the study showed that the goodness of fit was substantially improved by using nonlinear photosaturation and photoinhibition models. No distinct photoinhibition was observed within the range of light intensity that occurred during the data period. Moreover, since none of the nonlinear models showed a significantly better fit to the data, we may conclude that any of the models can be used for assessing the component rates of dissolved oxygen change.

Modélisation des fluctuations de l'oxygène dissous dans les cours d'eau par analyse de régression non linéaire

A.H. El-Shaarawi, A. Maul et B.G. Brownlee

INTRODUCTION

Quatre grands phénomènes influent sur la concentration de l'oxygène dissous dans un cours d'eau naturel : la production photosynthétique, la diffusion, la respiration et les apports par le drainage. La production primaire associée à la photosynthèse entraîne la libération d'oxygène dans l'eau. La diffusion, qui consiste en un échange d'oxygène entre l'eau et l'air, peut augmenter ou diminuer la concentration selon le gradient de saturation. La respiration des organismes benthiques ou planctoniques et l'oxydation chimique consomment de l'oxygène. Enfin, un enrichissement est possible par les eaux de drainage souterrain et superficiel. L'interaction de tous ces facteurs détermine la courbe journalière de l'oxygène dans un segment d'un cours d'eau. L'équation rendant compte de tous ces phénomènes s'exprime comme suit :

$$q = p + d - r + a \qquad (1)$$

où q, p, d, r et a s'expriment en unités de concentration (c.-à-d. g m^{-3} h^{-1}) et désignent respectivement la vitesse de changement de la concentration de l'oxygène dissous, la vitesse de la production primaire, la vitesse de la diffusion, la vitesse de la respiration et la vitesse des apports par drainage (Odum, 1956). Aux fins de la présente étude, on a supposé que ces derniers étaient négligeables par rapport aux autres influences. On a également supposé que la respiration était constante (Odum, 1956; Schurr et Ruchti, 1975). L'objectif de ce rapport était de proposer des méthodes indirectes, mais simples, pouvant servir à la détermination simultanée des vitesses de la production, de la diffusion et de la respiration, à partir de l'analyse de la courbe observée de l'oxygène dissous, lorsque les données disponibles proviennent d'une seule station prenant des mesures systématiques à des intervalles d'une heure. Ces méthodes consistent à appliquer une analyse de régression à des modèles non linéaires dérivés de l'équation (1). Il est supposé, par ailleurs, que le cours d'eau étudié est homogène, c'est-à-dire que les vitesses de la photosynthèse, de la diffusion et de la respiration sont les mêmes dans toutes ses parties.

Diverses méthodes ont été employées pour l'évaluation des différentes composantes de l'équation (1). Quelques-unes d'entre elles (p. ex. la méthode présentée par Odum, 1956) manquent d'exactitude et peuvent donc donner des résultats très approximatifs. D'autres ont été élaborées à partir d'hypothèses très strictes; par exemple, dans les modèles proposés par Schurr et Ruchti (1975), il est supposé que la production est proportionnelle à l'éclairement, ce qui est vrai seulement pour les faibles éclairements (Cosby et Hornberger, 1984).

Dans le présent rapport, on présente des équations mathématiques où il est tenu compte des effets de l'éclairement et de la température de l'eau, et on démontre l'application de celles-ci à l'analyse de la distribution temporelle des concentrations de l'oxygène dissous dans le ruisseau Canagagigue (Ontario). Il est bien connu que la température influe sur les vitesses des réactions physiques et biochimiques qui ont un effet sur la concentration de l'oxygène dissous et qu'elle conditionne également la vitesse et la direction des échanges d'oxygène avec l'air au voisinage de la concentration de saturation de l'oxygène dans l'eau, laquelle concentration est fonction de la température et de la pression atmosphérique (Hutchinson, 1957). L'effet de l'éclairement sur la photosynthèse constitue un aspect important de l'étude de la productivité primaire de l'eau. Des formules mathématiques exprimant le rapport entre la photosynthèse et la lumière et incorporant les paramètres biologiquement importants aident à connaître et à calculer la production primaire. De façon générale, la photosynthèse augmente de façon linéaire avec l'éclairement lorsque celui-ci est faible et elle se maintient à une valeur approximativement constante aux niveaux plus élevés (photosaturation); dans certains cas, une diminution s'observe aux éclairements plus intenses (photo-inhibition) (Cosby et Hornberger, 1984). De nombreux modèles mathématiques ont été proposés pour décrire cette relation curviligne; Iwakuma et Yasuno (1983) ainsi que Cosby et coll. (1984) ont comparé l'ajustement de plusieurs d'entre eux avec les courbes de la photosynthèse en fonction de l'éclairement obtenues pour des populations phytoplanctoniques naturelles.

LES MODÈLES

Les modèles que l'on présente diffèrent entre eux principalement par la formulation du rapport entre la productivité et la lumière. Dans tous les cas, la vitesse de diffusion est supposée proportionnelle à la différence (Δy) entre la concentration réelle de l'oxygène dissous (y) dans l'eau et sa concentration de saturation (O_s) (autrement dit, $\Delta y = O_s - y$). En acceptant le premier modèle examiné, les équations utilisées donnent des modèles non linéaires, et une méthode est indiquée pour estimer les paramètres se rapportant aux diverses composantes. L'algorithme employé pour estimer ces paramètres a la même structure générale pour tous les modèles; on en présentera, cependant, une description détaillée dans chaque cas.

L'expression générale du modèle est :

$$q = f(I) + k\,\Delta y - r + e \qquad (2)$$

où q est le vecteur de dimension n × 1 des observations (c.-à-d. $q_t = y_{t+1} - y_t$, autrement dit la différence entre deux concentrations successives observées de l'oxygène dissous); f représente une fonction de l'éclairement I (E m^{-2} h^{-1}) mesuré pour t = 1. . . m; k désigne le coefficient de réaération (h^{-1}); et e est le vecteur de dimension n × 1 dont on a supposé que les n éléments étaient des variables normales, indépendantes, de moyenne égale à zéro et de variance σ^2.

Modèle 1

Supposons que f soit une fonction linéaire de I. L'équation (2) devient alors :

$$q = \alpha I + k\,\Delta y - r + e \qquad (3)$$

et les paramètres α, k et r peuvent être estimés directement par analyse de régression linéaire.

Modèle 2

Le deuxième modèle examiné est un modèle de la photo-inhibition. On l'obtient en remplaçant f(I) dans l'équation (2) par la formule de Steele (Steele, 1962) qui est une équation de la courbe de la photosynthèse en fonction de l'éclairement (c.-à-d. $f(I) = p_{max}\ (I/I_s(e^{1-I/I_s}))$. Cette équation a deux paramètres : la vitesse maximale de la photosynthèse (p_{max}) et l'éclairement (I_s) au point où la pente initiale atteint p_{max} avant que la photosynthèse ne diminue (photo-inhibition).

On a donc :

$$q = \alpha\, I\, e^{1-\beta I} + k\,\Delta y - r + e \qquad (4)$$

où $\alpha = p_{max}/I_s$ et $\beta = 1/I_s$.

Estimation des paramètres du modèle

Comme la partie de droite de l'équation de régression (4) n'est pas linéaire pour tous les paramètres, une méthode itérative doit être employée pour l'estimation de α, β, k et r. Cette méthode est la suivante :

i) Si l'on applique la série de Taylor d'ordre 1 pour $e^{1-\beta I}$ au voisinage d'une valeur initiale β_0, le modèle peut s'écrire :

$$q = \alpha\, I\, e^{1-\beta_0 I} + \delta\, I^2\, e^{1-\beta_0 I} + k\,\Delta y - r + e \qquad (5)$$

qui est linéaire pour les paramètres inconnus α, δ, k et r.

ii) En commençant par β_0, on obtient des estimations de ces paramètres (c.-à-d. $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\delta}_1$, $\hat{k}_1$ et $\hat{r}_1$) par la méthode des moindres carrés.

iii) On remplace ensuite β_0 par $\beta_1 = \beta_0 - \hat{\delta}_1/\hat{\alpha}_1$.

iv) On continue l'itération (répétition des étapes (ii) et (iii)) jusqu'à ce que la différence entre $\hat{\beta}_k$ et $\hat{\beta}_{k-1}$ soit très faible, c.-à-d. jusqu'à ce que $\hat{\delta}_k$ soit inférieur à une valeur faible, prédéterminée. On prend alors les valeurs $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\beta}_k$, $\hat{k}_k$ et $\hat{r}_k$ pour $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{k}$ et $\hat{r}_k$.

Modèle 3

Un autre modèle s'obtient par remplacement de f(I) dans l'équation (2) par un modèle de la saturation (ne tenant pas compte de la photo-inhibition), déjà employé par Smith (1936).

L'équation de ce troisième modèle est :

$$q = \alpha\, \frac{I}{\sqrt{1 + \beta I^2}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (6)$$

Estimation des paramètres du modèle

Les paramètres du modèle (α, β, k et r) peuvent être estimés au moyen de l'algorithme suivant :

i) On développe le premier terme de la partie droite de l'équation (6) en une série de Taylor d'ordre 1 au voisinage d'une valeur initiale (β_0) de β et on le remplace par l'approximation ainsi obtenue dans l'équation (6). On a alors :

$$q = \alpha \frac{I}{\sqrt{1+\beta_0 I^2}} + \delta \frac{I^3}{2\sqrt{(1+\beta_0 I^2)^3}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (7)$$

qui est linéaire pour les paramètres inconnus α, δ, k et r. On répète ensuite les étapes (ii), (iii) et (iv) décrites pour le modèle 2.

Modèle 4

On obtient un autre modèle de la photo-inhibition en remplaçant, dans l'équation (2), f(I) par la formule de Vollenweider (Vollenweider, 1965), ce qui donne :

$$q = \alpha \frac{I}{\sqrt{1+\beta I^2}\sqrt{1+a^2\beta I^2}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (8)$$

où α est un paramètre rendant compte de la photo-inhibition dont la valeur est 0 lorsqu'il n'y a pas de photo-inhibition.

Estimation des paramètres du modèle

La méthode employée pour estimer les paramètres inconnus (c.-à-d. α, β, a, k et r) est assez semblable à celles qui ont été décrites pour les modèles précédents, sauf que les calculs sont plus longs. Par conséquent :

i) On développe le premier terme de la partie droite de l'équation (8) en une série de Taylor d'ordre 1 au voisinage de deux estimations initiales (c.-à-d. α_0 et β_0) de α et de β. On remplace ce terme par l'approximation ainsi obtenue, ce qui donne :

$$q = \alpha \frac{I}{\sqrt{1+\beta_0 I^2}\sqrt{1+a_0^2\beta_0 I^2}} + \delta \frac{I^3}{\sqrt{1+\beta_0 I^2}\sqrt{(1+a_0^2\beta_0 I^2)^3}} + \gamma \frac{I^3}{\sqrt{(1+\beta_0 I^2)^3}\sqrt{1+a_0^2\beta_0 I^2}} + k\,\Delta y - r + e \qquad (9)$$

qui est linéaire pour les paramètres inconnus α, δ, y, k et r.

ii) En commençant par a_0 et β_0, on obtient les estimations des paramètres (c.-à-d. $\hat{\alpha}_1$, $\hat{\delta}_1$, $\hat{\gamma}_1$, $\hat{k}_1$ et $\hat{r}_1$) par analyse de régression linéaire.

iii) On remplace ensuite a_0 et β_0 par, respectivement,

$$\alpha_1 = \alpha_0 - \frac{\hat{\delta} - a_0^2\,\hat{\gamma}}{\hat{\alpha}\,a_0\,\beta_0}$$

et

$$\beta_1 = \beta_0 - \frac{2\hat{\gamma}}{\hat{\alpha}}$$

et l'on répète l'étape (ii) en utilisant les nouvelles valeurs a_1 et β_1.

iv) L'itération prend fin dès que les deux différences $\hat{a}_k - \hat{a}_{k-1}$ et $\hat{\beta}_k - \hat{\beta}_{k-1}$ sont très petites, ou lorsque la somme $\hat{\delta}_k^2 + \hat{\gamma}_k^2$ est inférieure à une valeur faible prédéterminée. On utilise alors les valeurs de $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\beta}_k$, $\hat{a}_k$, $\hat{k}_k$ et $\hat{r}_k$ pour $\hat{\alpha}$, $\hat{\beta}$, $\hat{a}$, $\hat{k}$ et $\hat{r}$ respectivement.

Modèle 5

La concentration de l'oxygène dissous observée à un moment donné peut être considérée comme attribuable à la mesure précédente de l'éclairement (du moins sur une certaine période de temps). Un modèle approprié pour cette hypothèse, appelé modèle à décalages distribués géométriquement, a été proposé par Dhrymes (1971). Il s'agit de remplacer $f(I_k)$ dans l'équation (2) par :

$$p_t = \alpha \sum_{i=0}^{+\infty} \rho^i I_{t-i}$$

où I_{t-i} représente l'éclairement au temps t-i et ρ, le paramètre inconnu pour le décalage. Lorsque les valeurs de I_{-i} (i = 0, 1. . .) sont inconnues, on peut les éliminer du modèle en introduisant un paramètre additionnel, w, ayant pour équation : $w = \alpha \sum_{i=0}^{+\infty} \rho^i I_{-i}$. Par conséquent, on peut réécrire le modèle (2) comme suit :

$$q_t = w\rho^t + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} \rho^i I_{t-i} + k\,\Delta y_t - r + e \qquad (10)$$

$$t = 1,2. . .n$$

À remarquer que si ρ était connu, on aurait un modèle de régression linéaire, mais comme ρ est inconnu dans le cas actuel, on a un modèle qui n'est que partiellement linéaire. Les méthodes mises au point par El-Shaarawi (1977) et Shah et El-Shaarawi (1980) peuvent être employées pour l'estimation des paramètres w, α et ρ et pour le calcul de leurs intervalles exacts de confiance pour un degré de probabilité déterminé.

Estimation des paramètres du modèle

Pour déterminer $\hat{w}$, $\hat{\alpha}$ et $\hat{\rho}$:

i) On exprime q_t sous forme linéaire en développant ρ^t en une série de Taylor d'ordre 1 au voisinage d'une estimation initiale ρ_0; on obtient :

$$q_t = w\,\rho_0^t + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} \rho_0^i\, I_{t-i}$$

$$+ \delta \left[wt\rho_0^{t-1} + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} i\rho_0^{i-1}\, I_{t-i} \right] \qquad (11)$$

$$+ k\,\Delta y_t - r + e$$

où $\delta = \rho - \rho_0$ et t = 1,2. . .n.

ii) Pour une valeur donnée de ρ (ex. : ρ = 0.5), on obtient les estimations $\hat{w}_0$ et $\hat{\alpha}_0$ de w et α à partir de l'équation (10) par analyse de régression linéaire.

iii) On examine ensuite le modèle

$$q_t = w\,\rho_0^t + \alpha \sum_{i=0}^{t-1} \rho_0^i\, I_{t-i}$$

$$+ \delta \left[\hat{w}t\rho_0^{t-1} + \hat{\alpha}_0 \sum_{i=0}^{t-1} i\rho_0^{i-1}\, I_{t-i} \right] \qquad (12)$$

$$+ k\,\Delta y_t - r + e$$

qui est linéaire pour w, α, δ, k et r.

iv) On obtient à l'aide de ce modèle les nouvelles estimations $\hat{w}_1$, $\hat{\alpha}_1$ et $\hat{\delta}_1$ de w, α et δ, respectivement.

v) Dans le modèle (12), on remplace, respectivement, ρ_0, $\hat{w}_0$ et $\hat{\alpha}_0$ par $\rho_1 = \hat{\delta}_1 + \rho_0$, $\hat{w}_1$ et $\hat{\alpha}_1$, et on répète l'analyse de régression.

vi) On continue ainsi jusqu'à ce que la différence $\delta_k = \rho_k - \rho_{k-1}$ soit inférieure à une valeur prédéterminée et on prend $\hat{w}_k$, $\hat{\alpha}_k$, $\hat{\rho}_k$, $\hat{k}_k$ et $\hat{r}_k$ comme estimations de w, α, ρ, k et r, respectivement.

Il est à remarquer que tous les modèles sont interreliés. Par exemple, si a = 0 dans le modèle 4, on obtient alors le modèle 3, et si β = 0 dans le modèle 2 ou le modèle 3, on a alors le modèle linéaire (c.-à-d. le modèle 1). Par ailleurs, le modèle 1 constitue également un cas spécial du modèle 5, car l'équation (10) correspond à l'équation (3) lorsque ρ est posé égal à zéro. Soulignons, enfin, que lorsque I = 0, il y a absence de production et les modèles 1, 2, 3 et 4 se réduisent à :

$$q = k\,\Delta y - r + e \qquad (13)$$

On a ainsi une façon très simple d'évaluer les paramètres k et r. D'après l'équation (2), on peut poser que la production au moment t est donnée par l'équation $p_t = q_t - \hat{k}\,\Delta y_t + \hat{r}$. Par conséquent, le rapport entre la production et l'éclairement peut être évalué au moyen d'un graphique de p_t en fonction de I_t.

RÉSULTATS ET DISCUSSION

Les données brutes du ruisseau Canagagigue pour la période d'étude sont présentées à la figure 1 où l'on peut voir, en fonction du temps, en (a) la variation des concentrations observées et des concentrations de saturation de l'oxygène, en (b) la variation de l'éclairement et en (c) la variation de la température. La concentration de saturation de l'oxygène a été calculée à partir de la température mesurée et elle a été corrigée pour une altitude de 200 m au-dessus du niveau de la mer.

La production primaire, la constante d'échange de l'oxygène et la vitesse de respiration, qui caractérisent le métabolisme de l'oxygène dans un cours d'eau, ont été déterminées par analyse de régression non linéaire à partir d'une simple équation du bilan de masse de l'oxygène (voir équation (1)). La méthode diffère passablement de la technique de corrélation avec retard (croisée), mise au point par Schurr et Ruchti (1975), et de la méthode consistant à appliquer un filtre de Kalman étendu, employée par Cosby et coll. (1984) pour fournir les estimations des paramètres des modèles. Les algorithmes présentés dans la section précédente pour la modélisation de la vitesse de changement de la concentration de l'oxygène dissous ont donc produit les équations de régression suivantes, lesquelles ont été obtenues à l'aide de programmes spéciaux sur un système informatique APL :

$$q = 0.215\,\Delta y - 0.578 \qquad \text{(équation 13)}$$

$$q = 0.265\,I + 0.250\,\Delta y - 0.611 \qquad \text{(modèle 1)}$$

$$q = 0.246\,I\,e^{1-0.149I} + 0.329\,\Delta y - 0.870 \qquad \text{(modèle 2)}$$

$$q = 0.602\,I/\sqrt{1 + 0.108I^2} + 0.328\,\Delta y - 0.866 \qquad \text{(modèle 3)}$$

$$q = 0.651\,I/\sqrt{1 + 0.180I^2}\,\sqrt{1 + 0.004I^2} + 0.331\,\Delta y - 0.879 \qquad \text{(modèle 4)}$$

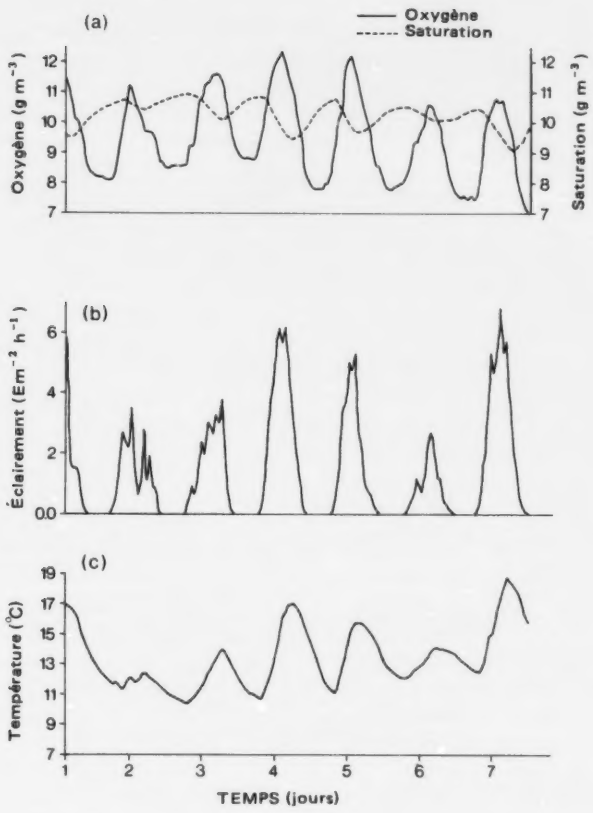

Figure 1. Données brutes de l'étude du ruisseau Canagagique.

$$q_t = 111.253 \times 0.001^t + 0.264 \sum_{i=0}^{t-1} 0.001^i\, I_{t-i} + 0.251\,\Delta y - 0.611 \qquad t = 1\ldots n \qquad \text{(modèle 5)}$$

Les courbes de la photosynthèse en fonction de l'éclairement pour les quatre premiers modèles examinés sont présentées à la figure 2. Dans la gamme des éclairements mesurés au cours de la période d'étude, il n'a semblé s'exercer aucune photo-inhibition. Les modèles 2, 3 et 4 sont, de façon générale, représentatifs de la variation de la photosynthèse en fonction de l'éclairement et ils se comportent de façon similaire.

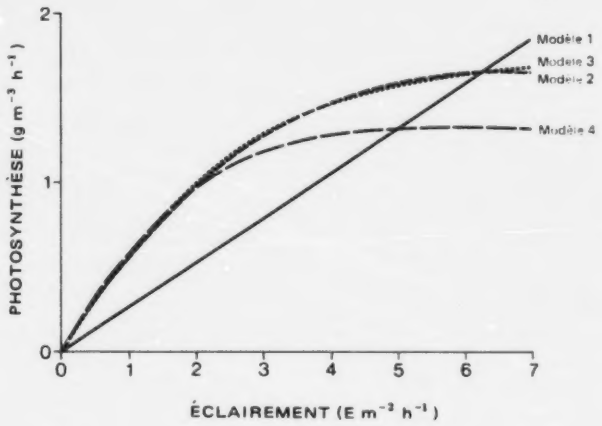

Figure 2. Courbes de la photosynthèse en fonction de l'éclairement obtenues à l'aide des valeurs des paramètres calculées au moyen des modèles, 1, 2, 3 et 4.

Sont données dans le tableau 1 les estimations des paramètres des modèles, les valeurs de p_{max}, celles de I_s et la pente (E_0) de la courbe de la photosynthèse en fonction de l'éclairement lorsque l'éclairement est près de zéro. Les résidus, indiqués dans la dernière colonne du tableau, permettent de comparer grossièrement la qualité relative de l'ajustement de chaque modèle.

Tableau 1. Résultats de l'analyse de la productivité : valeurs des paramètres et caractéristiques des courbes

Modèles	E_0	Pmax (g m^{-3} h^{-1})	I_s (E m^{-2} h^{-1})	k (h^{-1})	r (g m^{-3} h^{-1})	Résidus
1	0.265	Indéterminé	Indéterminé	0.250	0.611	13.115
2	0.669	1.654	6.717	0.329	0.870	9.560
3	0.602	1.831	Indéterminé	0.328	0.866	9.557
4	0.651	1.327	5.955	0.331	0.879	9.514
5*		$\rho \simeq 0.001$		0.251	0.611	13.111

* Le modèle 5, n'ayant apporté aucune amélioration par rapport au modèle 1 (qui représente un cas spécial du modèle 5 lorsque $\rho = 0$) n'a pas été retenu pour un examen plus poussé.

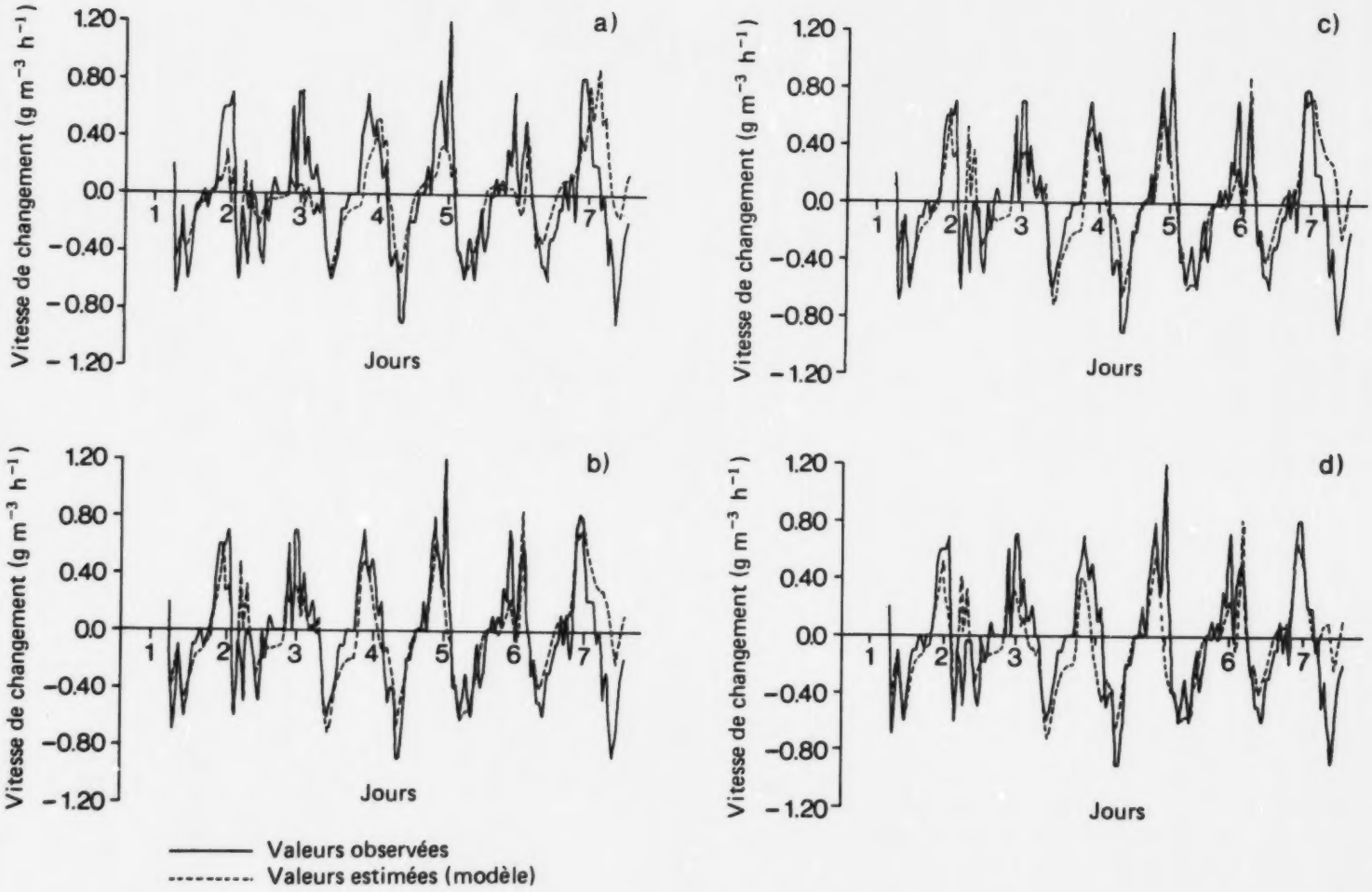

Figure 3. Courbes des concentrations observées et ajustées de l'oxygène dissous en fonction du temps pour la période d'étude.

Les figures 3(a), (b), (c) et (d), où sont tracées les vitesses observées et prévues de changement des concentrations de l'oxygène dissous en fonction du temps, offrent une façon plus commode d'évaluer la qualité relative de l'ajustement pour chaque modèle. Toute différence systématique entre les deux courbes est due au manque d'ajustement du modèle.

D'après la figure 3 et le résidu indiqué au tableau 1, le modèle 1 (linéaire) n'est pas très bien ajusté. Approximativement 45 % de la variance ($R^2 \simeq 0.45$) est expliquée par le modèle. On a appliqué la technique des changements de sens (Kendall et Stuart, 1968) pour déterminer si la série de résidus était aléatoire; autrement dit, on voulait savoir si la série de résidus différait de façon significative d'un bruit blanc gaussien. L'hypothèse nulle (les résidus sont aléatoires) a été rejetée au seuil de 1 % pour le modèle 1; le test était moins significatif pour les modèles 2 et 3 ($P \simeq 0.0475$) et le modèle 4 ($P \simeq 0.0314$). Même si aucun des modèles n'est vraiment adéquat, les modèles, 2, 3 et 4 ($R^2 \simeq 0.60$ pour les trois) sont nettement supérieurs au modèle 1. L'ajustement des données est donc assez semblable pour les trois modèles qui donnent des valeurs très rapprochées pour les paramètres et présentent des courbes se ressemblant beaucoup, surtout les modèles 2 et 3 (voir la figure 2 et le tableau 1). La proximité des résultats obtenus pour les vitesses de réaération et de respiration, plus particulièrement pour les modèles 2, 3 et 4, était prévisible, car la réaération et la respiration sont explicitement indépendantes de l'éclairement ou de la photosynthèse dans l'équation du bilan de masse. On en déduit que les équations (4), (6) et (8) peuvent toutes aussi bien être employées pour évaluer les vitesses des phénomènes influant sur la concentration de l'oxygène dissous.

En utilisant les estimations de k et de r obtenues au moyen de l'équation (13) (c.-à-d. pour I = 0), on a calculé les vitesses de réaération et de respiration données par toutes les équations de régression considérées; on a obtenu pour la réaération des valeurs entre 0.22 et 0.33 h^{-1} et pour la respiration des valeurs entre 0.58 et 0.88 g m^{-3} h^{-1}. De telles valeurs correspondent à celles qu'ont observées Cosby et coll. (1984) dans un petit cours d'eau de second ordre au Danemark et à celles qu'ont indiquées Schurr et Ruchti (1975) pour plusieurs cours d'eau de la Suisse.

Une fois connus les paramètres des modèles, il est possible de distinguer et d'évaluer séparément les différents phénomènes qui interagissent pour produire la courbe journalière des concentrations de l'oxygène. Ces phé-

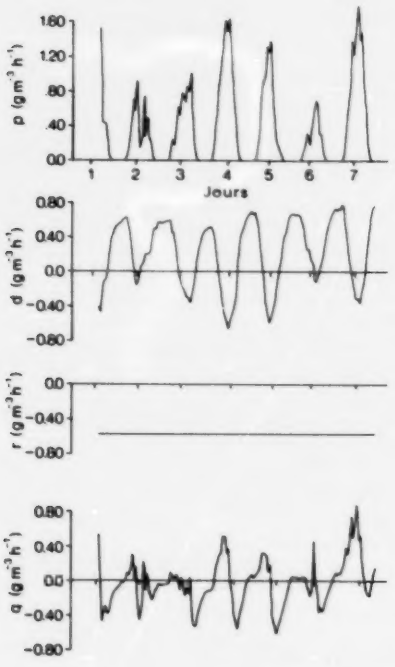

Figure 4a. Courbes des phénomènes participant au métabolisme de l'oxygène selon le modèle 1.

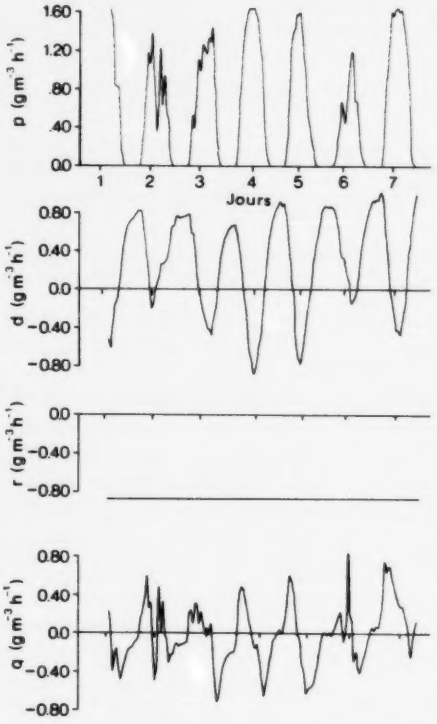

Figure 4b. Courbes des phénomènes participant au métabolisme de l'oxygène selon le modèle 2.

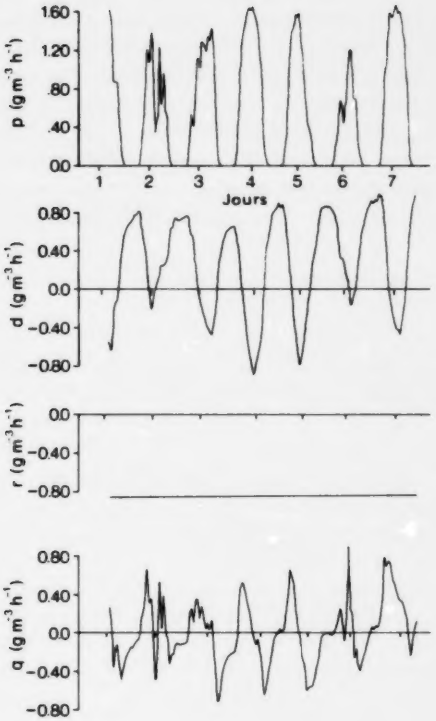

Figure 4c. Courbes des phénomènes participant au métabolisme de l'oxygène selon le modèle 3.

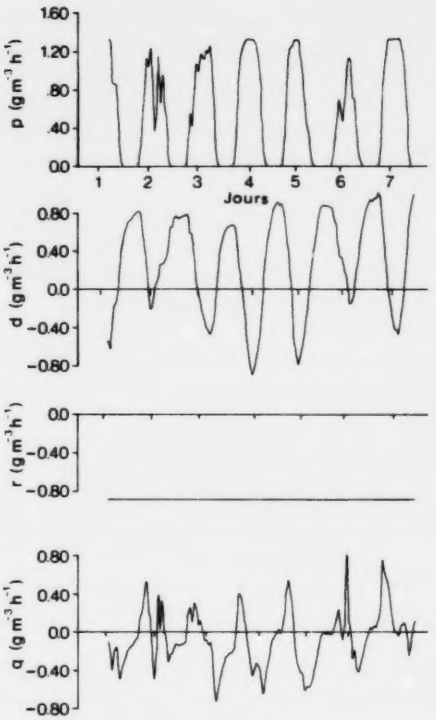

Figure 4d. Courbes des phénomènes participant au métabolisme de l'oxygène selon le modèle 4.

nomènes (la production, la diffusion et la respiration) sont exprimés dans l'équation de régression décrivant le bilan de l'oxygène. On a donc calculé, pour la période d'étude, les valeurs particulières pour les trois phénomènes en utilisant les équations de régression ajustées; les courbes obtenues pour chaque modèle sont présentées respectivement aux figures 4a à 4d. La courbe de la vitesse de changement (q) combine les effets de la production (p), de la diffusion (d) et de la respiration (r). Ces courbes, qui peuvent être considérées comme caractéristiques d'une section donnée d'un cours d'eau, du moins pour une période de temps précise, peuvent sans aucun doute aider à comprendre les mécanismes et l'importance relative des processus participant au métabolisme de l'oxygène. Par exemple, il ressort clairement de la courbe de la diffusion que les échanges avec l'air n'étaient pas bien équilibrés dans la partie étudiée, car l'oxygénation y apparaît plus importante que la désoxygénation. En conclusion, l'analyse de régression peut être appliquée à des modèles non linéaires pour l'étude des phénomènes participant au cycle journalier de l'oxygène dissous dans un cours d'eau.

RÉFÉRENCES

Cosby, B.J., et G.M. Hornberger. 1984. Identification of photosynthesis-light models for aquatic systems. I. Theory and simulations. Ecol. Modelling, 23: 1-24.

Cosby, B.J., G.M. Hornberger, et M.G. Kelly. 1984. Identification of photosynthesis-light models for aquatic systems. II. Application to a macrophyte dominated stream. Ecol. Modelling, 23: 25-51.

Dhrymes, P.J. 1971. *Econometrics: Statistical Foundations and Applications.* Harper & Row, New York.

El-Shaarawi, A. 1977. Marginal likelihood solution to some problems connected with regression analysis. J.R. Stat. Soc. B., 39: 343-348.

Hutchinson, G.E. 1957. *A Treatise on Limnology*. Vol. 1, Wiley. New York, pp. 580-581.

Iwakuma, T., et M. Yasuno. 1983. A comparison of several mathematical equations describing photosynthesis-light curve for natural phytoplankton populations. Arch. Hydrobiol., 97: 208-226.

Kendall, M.G., et A. Stuart. 1968. *The Advanced Theory of Statistics.* Vol. 3. Design and Analysis, and Time Series. 2e éd., Hafner, New York, pp. 350-352.

Odum, H.T. 1956. Primary production in flowing waters. Limnol. Oceanogr., 1: 102-117.

Schurr, J.M. et J. Ruchti. 1975. Kinetics of oxygen exchange, photosynthesis, and respiration in rivers determined from time-delayed correlations between sunlight and dissolved oxygen. Schweiz. Z. Hydrol., 37: 144-174.

Shah, K.R., et A. El-Shaarawi. 1980. Interval estimation in models with distributed lags. Dans *Multivariate Statistical Analysis,* R.P. Gupta (rédacteur), North-Holland Publ. Co., New York, pp. 191-197.

Smith, E.L. 1936. Photosynthesis in relation to light and carbon dioxide. Proc. Nat. Acad. Sci. Wash., 22: 504-511.

Steele, J.H. 1962. Environmental control of photosynthesis in the sea. Limnol. Oceanogr., 7: 137-150.

Vollenweider, R.A. 1965. Calculation models of photosynthesis-depth curves and some implications regarding day rate estimates in primary production measurements. Mem. 1st. Ital. Idrobiol. Suppl., 18: 425-457.